TEMA 3: Regresión (primera parte)

Regresión no paramétrica. El modelo de regresión lineal

José R. Berrendero

Departamento de Matemáticas, Universidad Autónoma de Madrid

Temas a tratar

- Objetivo
- Regresión no paramétrica
- Regresión múltiple
  - Estimación e inferencia
  - Comparación entre modelos
  - El error de predicción
  - Bootstrap en regresión
- Regresión con datos de alta dimensión
  - Selección de variables
  - Reducción de la dimensión: componentes principales
  - Regularización: ridge, lasso

Objetivo

Estudiar la relación entre una **variable respuesta** Y y un vector de p variables regresoras $X = (X_1, \ldots, X_p)$.

- Si $p = 1$ *regresión simple* y si $p > 1$ *regresión múltiple*
- Si Y también es un vector, *regresión multivariante*
- Si las variables regresoras son trayectorias de procesos estocásticos, *regresión funcional*

Una forma de resumir la relación entre $X_1, \ldots, X_p$ e Y es a través de la **función de regresión**

$$m(X) = \mathrm{E}(Y|X), \quad m(x) = \mathrm{E}(Y|X = x)$$

Ya vimos que $m(X)$ es la mejor predicción de Y a partir de X (en el sentido del error cuadrático medio).

El objetivo general es estimar $m(x)$ a partir de n observaciones iid de entrenamiento $(x_1, y_1), \ldots, (x_n, y_n)$, donde $x_i = (x_{i,1}, \ldots, x_{i,p})$.

Modelos de regresión

El modelo general que se suele asumir para los datos es el siguiente:

$$Y = m(X) + \epsilon$$

- $\mathrm{E}(\epsilon|X) = 0$ o, equivalentemente, $m(X) = \mathrm{E}(Y|X)$
- Homocedasticidad: $\mathrm{Var}(\epsilon|X) = \sigma^2$

Estas hipótesis implican $\mathrm{E}(\epsilon) = 0$, $\mathrm{Var}(\epsilon) = \sigma^2$ y $\mathrm{E}(X\epsilon) = 0$

Según las hipótesis adicionales que se asumen sobre $m(x)$ hay muchos posibles modelos:

- Modelo de regresión lineal

  $$m(X) = m(X_1, \ldots, X_p) = \beta_0 + \beta_1 X_1 + \cdots + \beta_p X_p$$

- Modelos no paramétricos: suelen suponer condiciones de continuidad o suavidad (existencia de derivadas) de la función $m(x)$.

Estimador de Nadaraya-Watson

El vector (X, Y) tiene densidad conjunta $f(x, y)$ y la densidad marginal de X es $g(x)$:

$$m(x) = \mathrm{E}(Y|X = x) = \int y f(y|x) dy = \frac{\int y f(x, y) dy}{g(x)}$$

Idea: reemplazar las densidades que aparecen en la expresión anterior por sus estimadores del núcleo (con los mismos núcleos simétricos y parámetros de suavizado):

$$\hat{g}(x) = \frac{1}{nh} \sum_{i=1}^{n} K\left(\frac{x - X_i}{h}\right),$$

$$\hat{f}\,(x, y) = \frac{1}{nh^2} \sum_{i=1}^{n} K\left(\frac{x - X_i}{h}\right) K\left(\frac{y - Y_i}{h}\right).$$

El estimador es

$$\hat{m}(x) = \frac{\sum_{i=1}^{n} K\left(\frac{x - X_i}{h}\right) Y_i}{\sum_{i=1}^{n} K\left(\frac{x - X_i}{h}\right)}$$

Estimador de Nadaraya-Watson

Interpretación como promedio ponderado localmente

Si definimos las ponderaciones

$$w_i(x) = \frac{K\left(\frac{x-X_i}{h}\right)}{\sum_{i=1}^n K\left(\frac{x-X_i}{h}\right)}$$

entonces $\hat{m}(x) = \sum_{i=1}^n w_i(x) Y_i$

El estimador es una media de las Y_i ponderadas localmente de manera que para estimar $m(x)$ se promedian únicamente los valores Y_i tales que $X_i \approx x$

Cuestión: ¿A dónde converge $\hat{m}(x_i)$ cuando $h \to 0$? ¿A dónde converge $\hat{m}(x)$ si $h \to \infty$?

Estimador de Nadaraya-Watson

Interpretación como un estimador de mínimos cuadrados

El estimador de Nadaraya-Watson evaluado en x es el valor $\hat{\beta}_0$ para el que se minimiza $\sum_{i=1}^{n} w_i(x)(Y_i - \beta_0)^2$

Se ajusta una constante por mínimos cuadrados ponderados localmente.

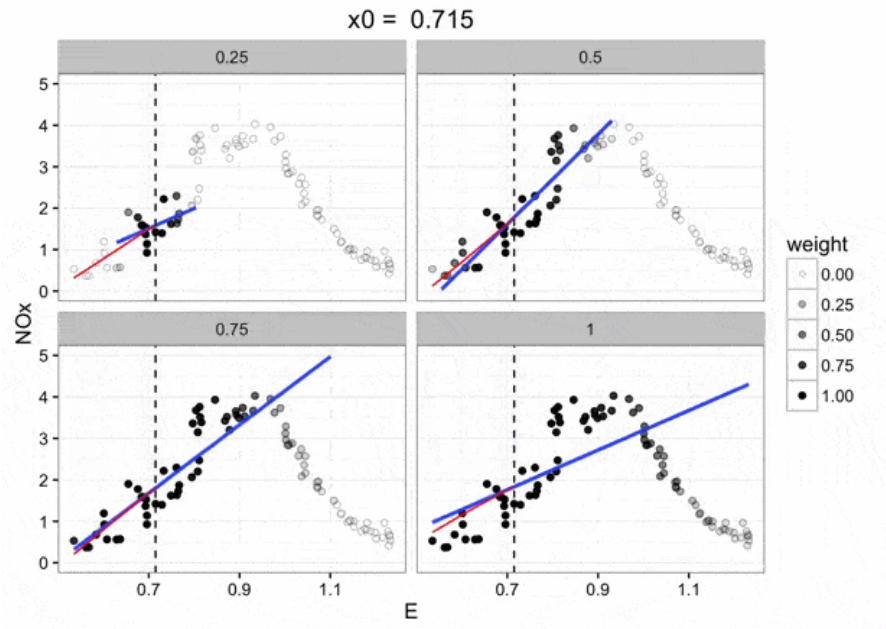
Generalización: regresión localmente polinómica

$\hat{m}(x) = \hat{\beta}_0 + \hat{\beta}_1 x + \hat{\beta}_2 x^2 + \cdots + \hat{\beta}_p x^p$, donde $\hat{\beta}_0, \ldots, \hat{\beta}_p$ minimizan

$$\sum_{i=1}^{n} w_i(x)(Y_i - \beta_0 - \beta_1(x_i - x) - \beta_2(x_i - x)^2 - \beta_p(x_i - x)^p$$

Loess (locally estimated scatterplot smoothing)

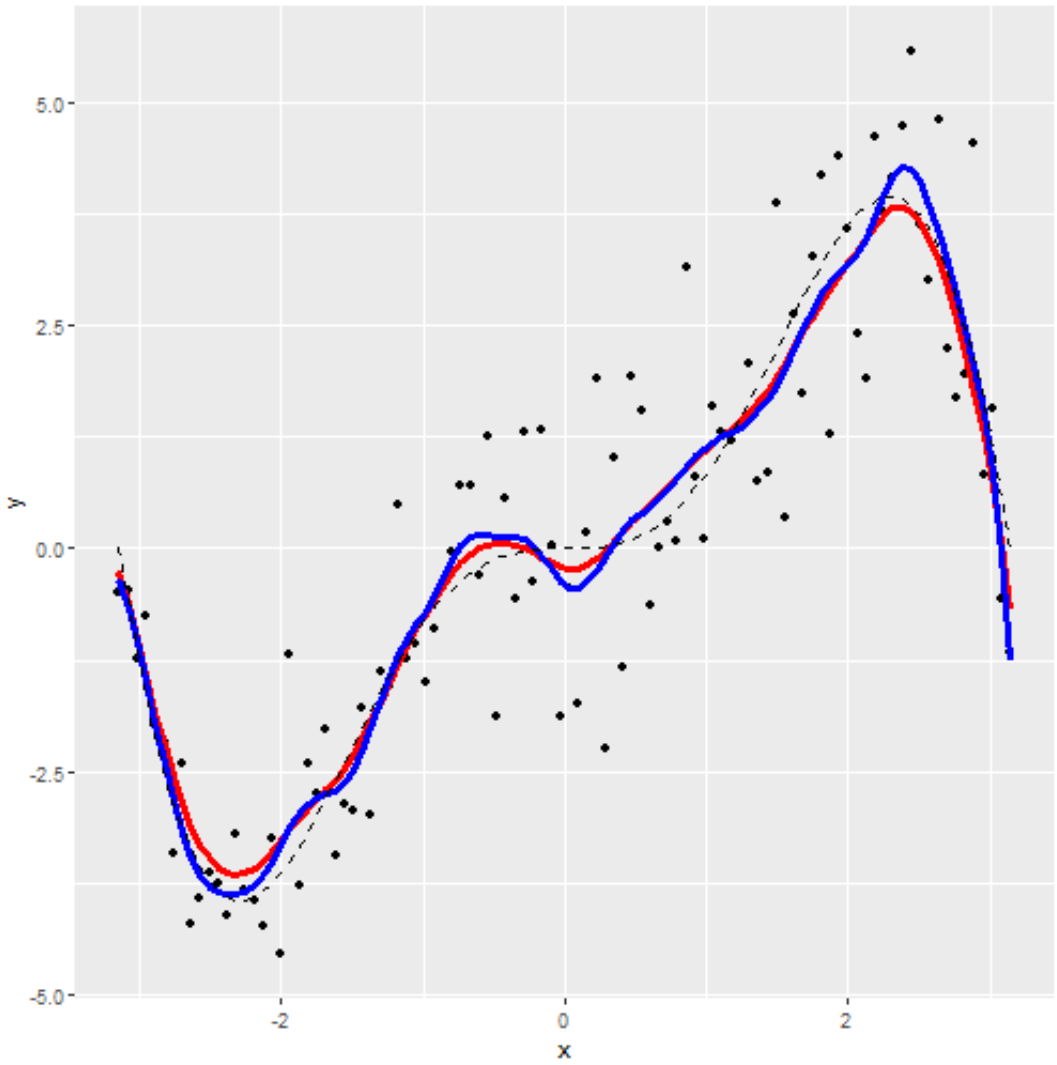
Estimador localmente lineal



kernSmooth::locpoly

```
# La curva de regresión verdadera
fun_reg <- function(x){
  x^2 * sin(x)
}

# Genera los datos
set.seed(100)
n <- 100
x <- seq(-pi, pi, length.out = n)
y <- fun_reg(x) + rnorm(length(x), sd = 1)
df <- data.frame(x, y)

# Ajuste localmente lineal
ajuste1 <- with(df, locpoly(x, y, degree = 1, bandwidth =
# Ajuste localmente cuadrático
ajuste2 <- with(df, locpoly(x, y, degree = 2, bandwidth =

# Representación gráfica
df %>%
  mutate(curva1 = ajuste1$y) %>%
  mutate(curva2 = ajuste2$y) %>%
  ggplot() +
  geom_point(aes(x, y)) +
  geom_line(aes(x, curva1), color="red", size = 1.1) +
  geom_line(aes(x, curva2), color = 'blue', size = 1.1) +
  plot_function(fun = 'fun_reg', linetype = 2)   # curva
```

kernSmooth::locpoly



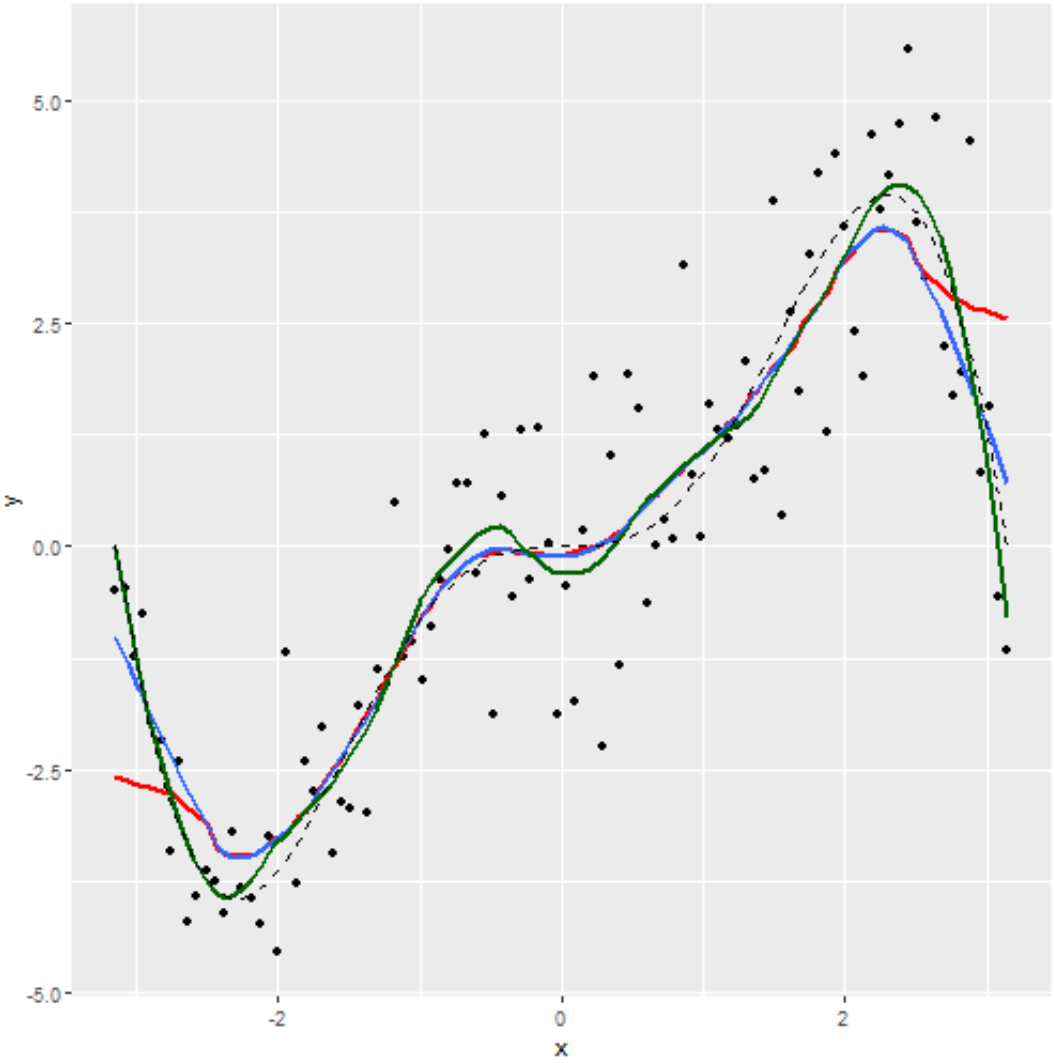
Observaciones

- Selección del parámetro de suavizado (`dpill()`) propuesto por Ruppert, Sheather y Wand (1995)
- Usando `ggplot2()`, el comando `geom_smooth` usa `loess`
  - El nivel de suavizado se controla con `span`, la proporción de datos que se usan en el ajuste local.
  - Usa un núcleo de la forma $K(x) = (1 - |x|^3)^3$, si $|x| \leq 1$.

En el siguiente ejemplo se compara Nadaraya-Watson con los ajustes de grado 1 y 2:

```
df <- data.frame(x, y)

ggplot(df, aes(x, y)) +
  geom_point() +
  geom_smooth(method = 'loess', se = FALSE, span = 0.25,
  geom_smooth(method = 'loess', se = FALSE, span = 0.25,
  geom_smooth(se = FALSE, span = 0.25, col = 'darkgreen')
  geom_function(fun = 'fun_reg', linetype = 2)
```

Ejemplo



El ECMI del estimador de Nadaraya-Watson

Aproximaciones al sesgo y la varianza del estimador de Nadaraya-Watson:

Término de varianza

$$\int \mathrm{Var}[\hat{m}(x)]dx \approx \frac{\sigma^2 \|K\|_2^2}{nh} \int \frac{dx}{g(x)}, \quad nh \text{ grande}$$

Término de sesgo

$$\int (\mathrm{E}(\hat{m}(x)) - m(x))^2 dx \approx \frac{h^4}{4}\sigma_K^4 \int \left(m''(x) + 2\frac{m'(x)g'(x}{g(x)}$$

- Si $g(x) \approx 0$, el valor $\hat{m}(x)$ es muy variable porque alrededor de x hay poca información
- El término $2m'(x)g'(x)/g(x)$ corresponde a un sesgo de diseño, depende de la distribución de X. Este término desaparece cuando se usa regresión localmente lineal.

Mínimos cuadrados penalizados

- Los estimadores son las funciones que minimizan $\phi(\lambda)$, para un valor $\lambda > 0$, donde

$$\phi(\lambda) := \sum_{i=1}^{n}(Y_i - m(x_i))^2 + \lambda \int_a^b m''(x)^2 dx$$

- El primer término mide el ajuste a los datos, el segundo controla la suavidad del estimador
- ¿A qué se parece el resultado si $\lambda \to 0$? ¿Y si $\lambda \to \infty$?
- La solución del problema, un compromiso entre ajuste y suavidad, es un *spline*

Splines

Sea $a < x_1 < \cdots < x_n < b$ un conjunto de nodos. Un **spline cúbico** es una función continua tal que

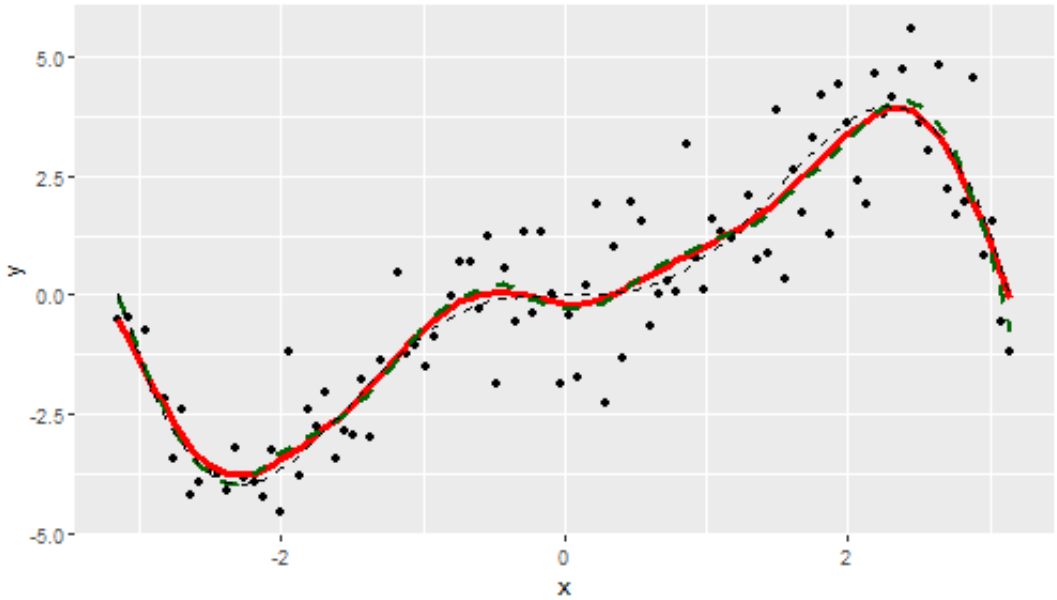
- Es un polinomio cúbico en cada intervalo (x_i, x_{i+1})
- Las primeras y las segundas derivadas en los nodos son continuas

Si además la función es lineal a la izquierda de x_1 y a la derecha de x_n se llama **spline cúbico natural**.

Proposición. La función que minimiza $\phi(\lambda)$ es un spline cúbico natural cuyos nodos corresponden a los puntos muestrales $x_1, \ldots, x_n$.

Implementación (smooth.spline)

```
splines <- smooth.spline(x, y, cv = TRUE)
df <- df %>%
  mutate(yfit = splines$y, xfit = splines$x)

ggplot(df) +
  geom_point(aes(x, y)) +
  geom_line(aes(xfit, yfit), color="red", size = 1.1) +
  geom_smooth(aes(x, y), se = FALSE, span = 0.25, col = '
  geom_function(fun = 'fun_reg', linetype = 2)
```



El modelo de regresión lineal múltiple

El modelo de regresión más usual es el siguiente:

$$Y = \beta_0 + \sum_{j=1}^{p} \beta_j X_j + \epsilon$$

donde $\mathrm{E}(\epsilon|X_1, \ldots, X_p) = 0$ y
$\mathrm{Var}(\epsilon|X_1, \ldots, X_p) = \sigma^2$.

Para muchas inferencias (intervalos, contrastes, etc.) se asume que $\epsilon|(X_1, \ldots, X_p)$ tiene distribución normal.

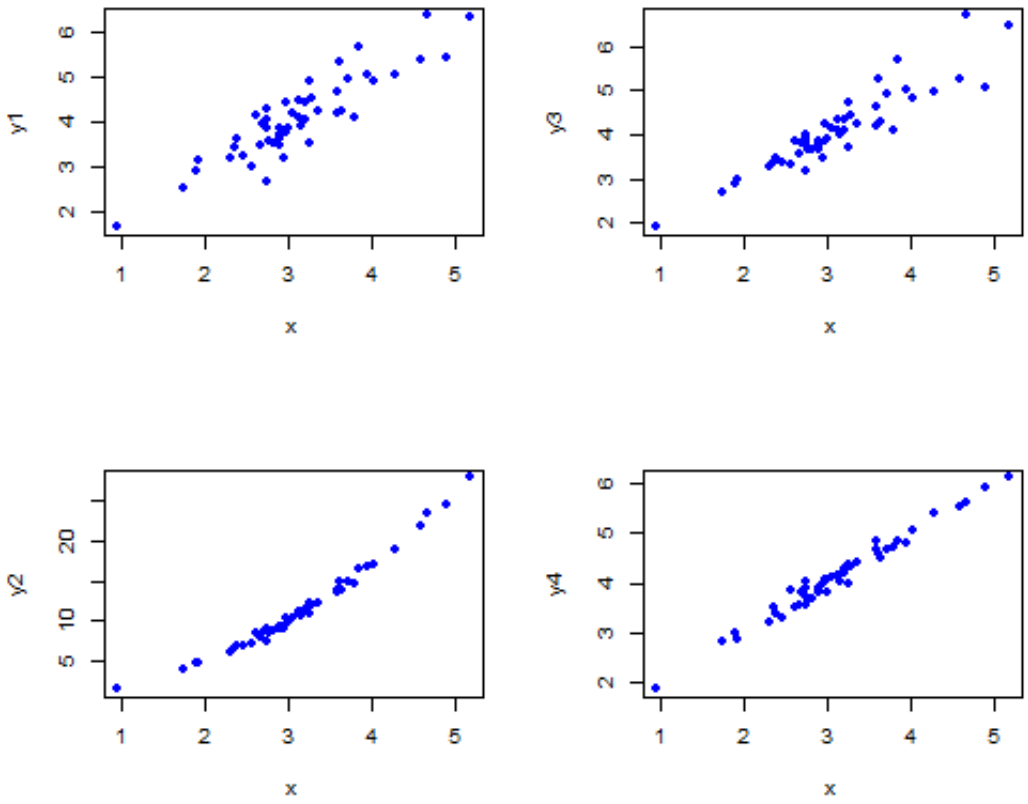
Cada observación de la muestra de entrenamiento sigue el modelo

$$y_i = \beta_0 + \sum_{j=1}^{p} \beta_j x_{i,j} + \epsilon_i, \quad i = 1, \ldots, n.$$

donde $\mathrm{E}(\epsilon_i|x_i) = 0$ y $\mathrm{Var}(\epsilon_i|x_i) = \sigma^2$.

El modelo de regresión lineal múltiple

¿Cuáles de los siguientes conjuntos de datos verifican el modelo?



El modelo de regresión lineal múltiple

En forma matricial,

$$\begin{pmatrix} y_1 \\ y_2 \\ \vdots \\ y_n \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & x_{1,1} & \dots & x_{1,p} \\ 1 & x_{2,1} & \dots & x_{2,p} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 1 & x_{n,1} & \dots & x_{n,p} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \beta_0 \\ \beta_1 \\ \vdots \\ \beta_p \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} \epsilon_1 \\ \epsilon_2 \\ \vdots \\ \epsilon_n \end{pmatrix}$$

De forma más compacta,

$$Y = X\beta + \epsilon, \;\; \epsilon|X \equiv \mathrm{N}_n(0, \sigma^2\mathbb{I}_n) \Leftrightarrow Y|X \equiv \mathrm{N}_n(X\beta, \sigma^2\mathbb{I}_n)$$

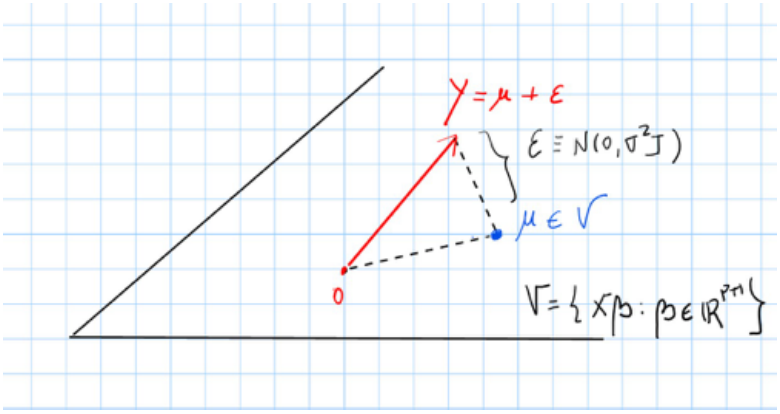
X es la **matriz de diseño**

Interpretación geométrica

Llamaremos $V = R(X) \subset \mathbb{R}^n$ al subespacio vectorial generado por las columnas de la matriz de diseño X

$$\mu \in V \Leftrightarrow \text{Existe } \beta \in \mathbb{R}^{p+1} \text{ tal que } \mu = X\beta$$

El modelo de regresión equivale a
$Y|X \equiv \mathrm{N}_n(\mu, \sigma^2 \mathbb{I}_n)$, donde $\mu \in V$.



Ajuste por mínimos cuadrados

- Estimadores de mínimos cuadrados: los coeficientes $\hat{\beta}_0, \ldots, \hat{\beta}_p$ para los que se minimiza

$$\|Y - X\beta\|_2^2 = \sum_{i=1}^{n} [Y_i - (\beta_0 + \beta_1 x_{i,1} + \ldots + \beta_p x_{i,p})]^2$$

- $\hat{Y} \equiv X\hat{\beta}$ es la **proyección ortogonal** de Y sobre V.

- Ecuaciones normales: el vector $e = Y - \hat{Y} = Y - X\hat{\beta}$ se denomina **vector de residuos**. Los residuos deben ser ortogonales a las columnas de X (una base de V):

$$X'(Y - \hat{Y}) = 0 \Leftrightarrow X'e = 0$$

- Expresión de los estimadores de mínimos cuadrados:

$$\hat{\beta} = (X'X)^{-1}X'Y$$

Ajuste por mínimos cuadrados

- El estimador de mínimos cuadrados es el estimador de máxima verosimilitud (EMV) de β:

$$L(\beta, \sigma^2) = \left(\frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma}\right)^n \exp\left\{-\frac{1}{2\sigma^2}\|Y - X\beta\|_2^2\right\}$$

- El vector $\hat{\beta}$ tiene distribución normal $(p+1)$-dimensional con vector de medias β y matriz de covarianzas $\sigma^2(X'X)^{-1}$:

$$\hat{\beta} \equiv \mathrm{N}_{p+1}(\beta, \sigma^2(X'X)^{-1})$$

- El vector de **valores ajustados** es

$$\hat{Y} = X\hat{\beta} = HY, \quad H = X(X'X)^{-1}X'$$

  A H se le llama *matriz sombrero*, y geométricamente es una matriz de proyección sobre V

- El vector de residuos es entonces $e = Y - \hat{Y} = (I - H)Y$

Ajuste por mínimos cuadrados

- Para estimar la varianza σ^2 se usa la **varianza residual**

$$S_R^2 = \frac{1}{n-p-1}\sum_{i=1}^{n} e_i^2$$

  ¿Por qué estos son los grados de libertad apropiados?

- Un resultado importante es que $(n-p-1)S_R^2/\sigma^2 \equiv \chi^2_{n-p-1}$, lo que permite construir intervalos de confianza y contrastes para σ^2

- Además, S_R^2 y $\hat{\beta}$ son independientes

Los resultados que acabamos de resumir son la base para obtener los intervalos y contrastes para los coeficientes del modelo

Descomposición de la variabilidad

- **Suma de cuadrados total:** $\mathrm{SCT} = \sum_{i=1}^{n} (Y_i - \bar{Y})^2$, mide la variabilidad total en la respuesta.
- **Suma de cuadrados explicada:** $\mathrm{SCE} = \sum_{i=1}^{n} (\hat{Y}_i - \bar{Y})^2$, mide la parte de la variabilidad explicada por el modelo.
- **Suma de cuadrados residual:** $\mathrm{SCR} = \sum_{i=1}^{n} e_i^2$, mide la parte de la variabilidad no explicada por el modelo.

Usando la ortogonalidad de los residuos con las variables regresoras

$$\mathrm{SCT} = \mathrm{SCE} + \mathrm{SCR}$$

La variabilidad total de la respuesta se puede descomponer en una parte explicada por las variables regresoras y otra no explicada o residual

Descomposición de la variabilidad

- El **coeficiente de determinación** es una medida de la capacidad del modelo para explicar Y:

$$R^2 = \frac{\text{SCE}}{\text{SCT}}$$

- **Contraste de la regresión:** Para contrastar $H_0 : \beta_1 = \cdots = \beta_p = 0$ se usa

$$F = \frac{\text{SCE}/p}{\text{SCR}/(n-p-1)}$$

Bajo H_0, el estadístico F sigue una distribución $F_{p,n-p-1}$

Ajuste del modelo con R

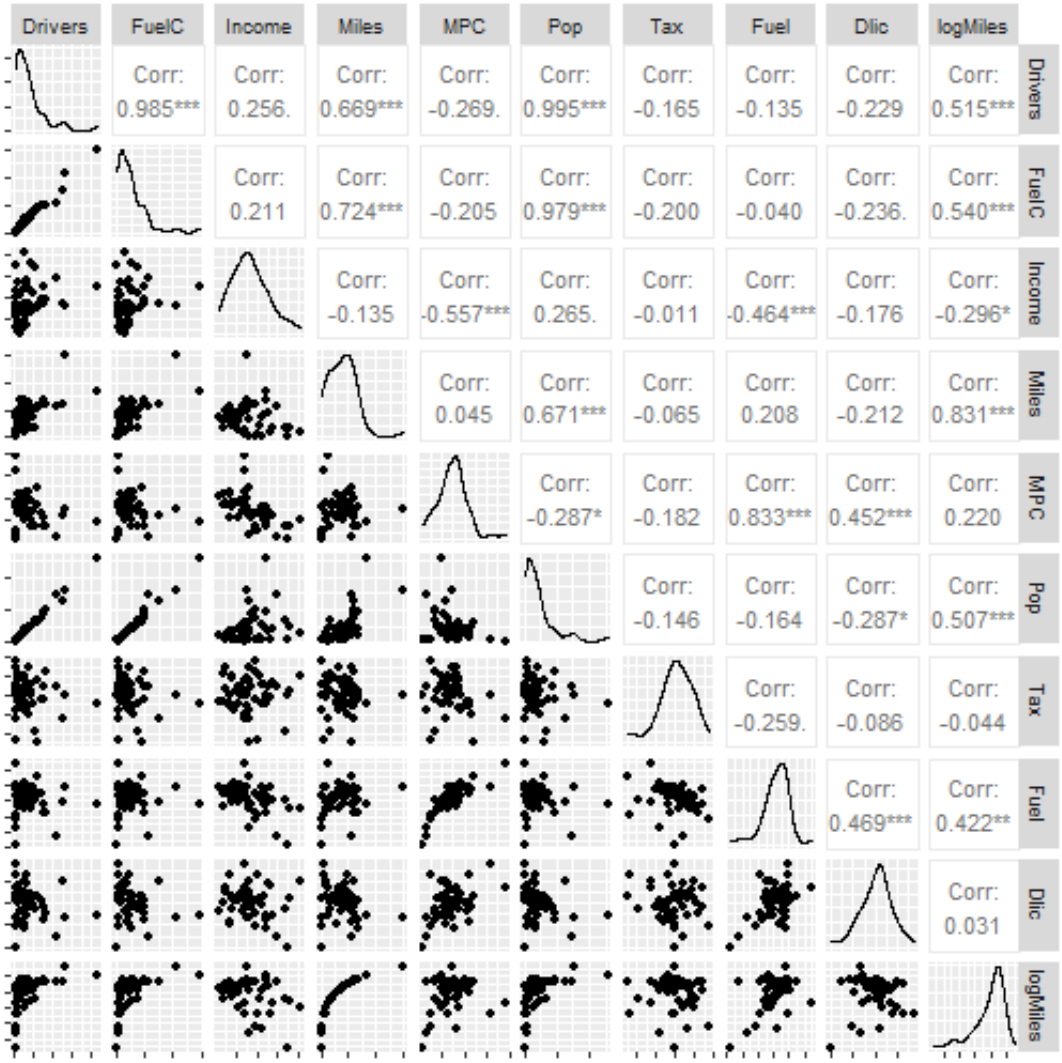
- Datos `fuel2001`: consumo de combustible (y otras variables relacionadas) en EE.UU.

```
datos <- 'http://verso.mat.uam.es/~joser.berrendero/datos
load(url(datos))
head(fuel2001)
```

```
##     Drivers    FuelC Income  Miles      MPC      Pop  Tax
## AL  3559897  2382507  23471  94440 12737.00  3451586 18.0
## AK   472211   235400  30064  13628  7639.16   457728  8.0
## AZ  3550367  2428430  25578  55245  9411.55  3907526 18.0
## AR  1961883  1358174  22257  98132 11268.40  2072622 21.7
## CA 21623793 14691753  32275 168771  8923.89 25599275 18.0
## CO  3287922  2048664  32949  85854  9722.73  3322455 22.0
```

```
fuel2001 <- fuel2001 %>%
  mutate(Fuel = 1000 * FuelC/Pop) %>%
  mutate(Dlic = 1000 * Drivers/Pop) %>%
  mutate(logMiles = log(Miles))

# Diagramas de dispersión
library(GGally)
ggpairs(fuel2001) +
  theme(axis.text=element_blank())
```

Ajuste del modelo con R



Ajuste del modelo con R

```
reg <- lm(Fuel ~ Tax + Dlic + Income + logMiles,
          data=fuel2001)
summary(reg)
```

```
##
## Call:
## lm(formula = Fuel ~ Tax + Dlic + Income + logMiles, data = fuel2
##
## Residuals:
##      Min       1Q   Median       3Q      Max
## -163.145  -33.039    5.895   31.989  183.499
##
## Coefficients:
##               Estimate Std. Error t value Pr(>|t|)
## (Intercept) 154.192845 194.906161   0.791 0.432938
## Tax          -4.227983   2.030121  -2.083 0.042873 *
## Dlic          0.471871   0.128513   3.672 0.000626 ***
## Income       -0.006135   0.002194  -2.797 0.007508 **
## logMiles     26.755176   9.337374   2.865 0.006259 **
## ---
## Signif. codes:  0 '***' 0.001 '**' 0.01 '*' 0.05 '.' 0.1 ' ' 1
##
## Residual standard error: 64.89 on 46 degrees of freedom
## Multiple R-squared:  0.5105,    Adjusted R-squared:  0.4679
## F-statistic: 11.99 on 4 and 46 DF,  p-value: 9.331e-07
```

Ajuste del modelo con R

```
nuevo.dato <- data.frame(18, 1031, 23471, 11)
names(nuevo.dato) <- names(fuel2001)[c(7, 9, 3, 10)]
nuevo.dato
```

```
##   Tax Dlic Income logMiles
## 1  18 1031  23471       11
```

```
predict(reg, nuevo.dato, interval='confidence')
```

```
##        fit      lwr      upr
## 1 714.8929 674.1173 755.6686
```

```
predict(reg, nuevo.dato, interval='prediction')
```

```
##        fit      lwr      upr
## 1 714.8929 578.0571 851.7288
```

Modelo reducido y modelo completo

- Un modelo complejo se ajusta mejor a los datos disponibles pero ello no significa que proporcione mejores predicciones
- Un modelo sencillo evita el sobreajuste pero puede introducir sesgos
- Objetivo: comparar dos modelos lineales tales que uno es una simplificación del otro contrastando $H_0 : A\beta = 0$, donde A es una matriz $k \times (p+1)$ con $\text{rango}(A) = k < p+1$.
- Por ejemplo, en el modelo $Y_i = \beta_0 + \beta_1 x_{i1} + \beta_2 x_{i2} + \beta_3 x_{i3} + \epsilon_i$, queremos contrastar

  $$H_0 : \beta_1 = \beta_2; \beta_0 = 0 \Leftrightarrow A\beta = 0$$

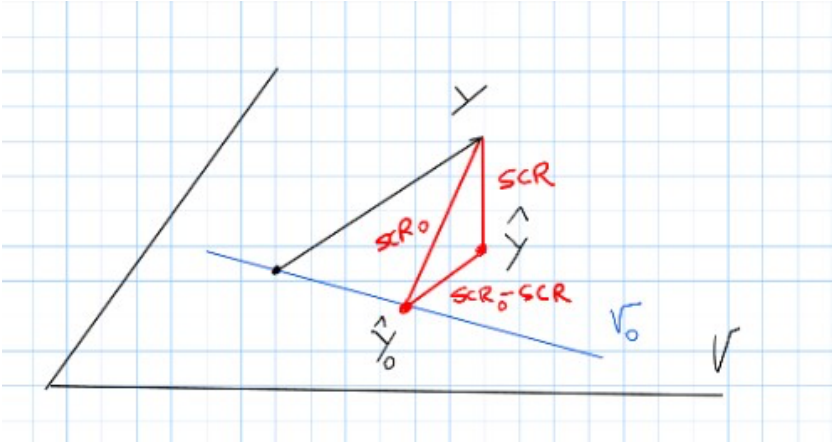
  donde

  $$A = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & -1 & 0 \end{pmatrix}$$

El **modelo reducido** (M0) es el que resulta de imponer las restricciones de H_0

Interpretación geométrica

El modelo reducido equivale a $\mu \in V_0 \subset V$, donde V_0 es un supespacio de V de dimensión $p + 1 - k$



La idea básica

- SCR_0 es la variabilidad no explicada (residual) bajo el modelo reducido
- SCR es la variabilidad no explicada (residual) bajo el modelo completo
- Siempre se cumple $\mathrm{SCR}_0 > \mathrm{SCR}$ (¿por qué?) Se rechaza H_0 si

$$\frac{\mathrm{SCR}_0 - \mathrm{SCR}}{\mathrm{SCR}}$$

es suficientemente grande (si complicar el modelo merece la pena)

- Bajo $H_0 : A\beta = 0$, se verifica

$$\frac{(\mathrm{SCR}_0 - \mathrm{SCR})/k}{\mathrm{SCR}/(n-p-1)} \equiv F_{k,n-p-1}$$

La región crítica del contraste para un nivel α es

$$R = \left\{ \frac{(\mathrm{SCR}_0 - \mathrm{SCR})/k}{\mathrm{SCR}/(n-p-1)} > F_{k,n-p-1;\alpha} \right\}$$

Comparación con R

Se ajustan ambos modelos:

```
# Modelo completo
reg <- lm(Fuel ~ Tax + Dlic + Income + logMiles,
          data=fuel2001)

# Modelo reducido
reg0 <- lm(Fuel ~ logMiles, data=fuel2001)
anova(reg0)
```

```
## Analysis of Variance Table
##
## Response: Fuel
##           Df Sum Sq Mean Sq F value   Pr(>F)
## logMiles   1  70478   70478  10.619 0.002038 **
## Residuals 49 325216    6637
## ---
## Signif. codes:  0 '***' 0.001 '**' 0.01 '*' 0.05 '.' 0.1 ' ' 1
```

Comparación con R

Se comparan las sumas de cuadrados residuales usando el comando anova

```
anova(reg0, reg)
```

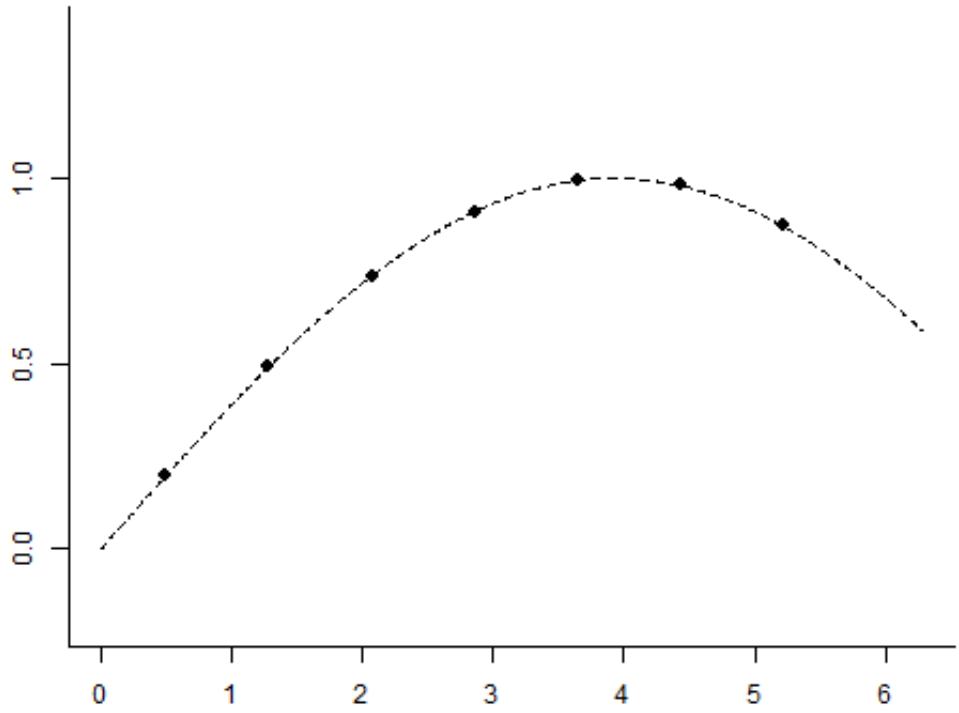
```
## Analysis of Variance Table
##
## Model 1: Fuel ~ logMiles
## Model 2: Fuel ~ Tax + Dlic + Income + logMiles
##   Res.Df    RSS Df Sum of Sq      F    Pr(>F)
## 1     49 325216
## 2     46 193700  3    131516 10.411 2.402e-05 ***
## ---
## Signif. codes:  0 '***' 0.001 '**' 0.01 '*' 0.05 '.' 0.1 ' ' 1
```

$$F = \frac{\frac{\mathrm{SCR}_0 - \mathrm{SCR}}{k}}{\frac{\mathrm{SCR}}{n-p-1}} = \frac{\frac{325216-193700}{3}}{\frac{193700}{46}} = 10.411$$

El contraste $H_0 : \beta_1 = \cdots = \beta_p = 0$ es un caso particular de comparación entre un modelo reducido y un modelo completo

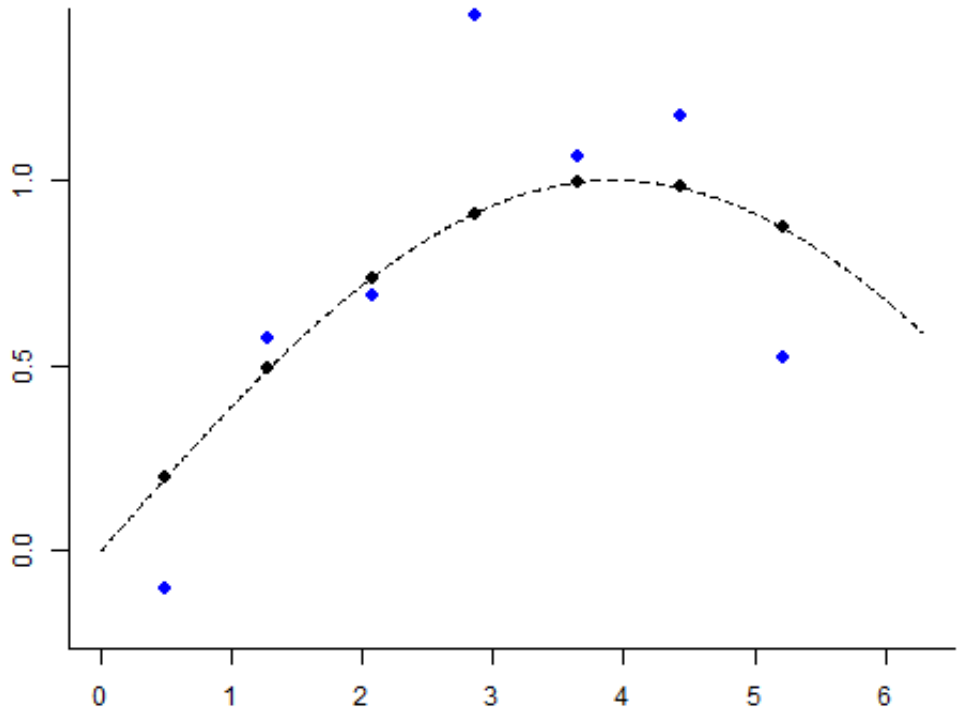
Error de predicción

Modelo verdadero



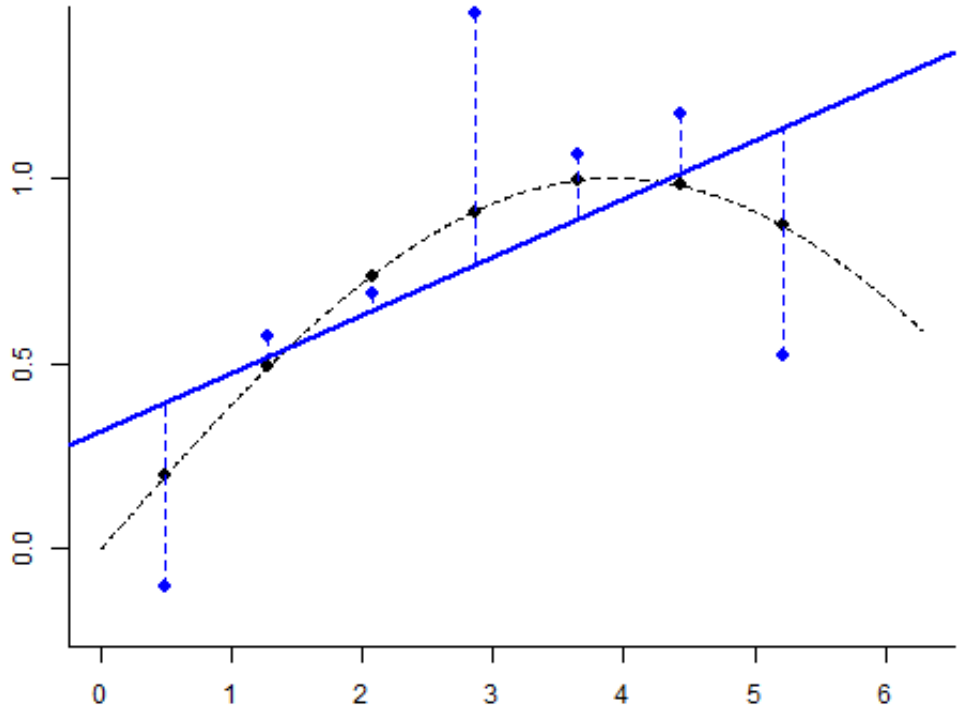
Error de predicción

Datos de entrenamiento



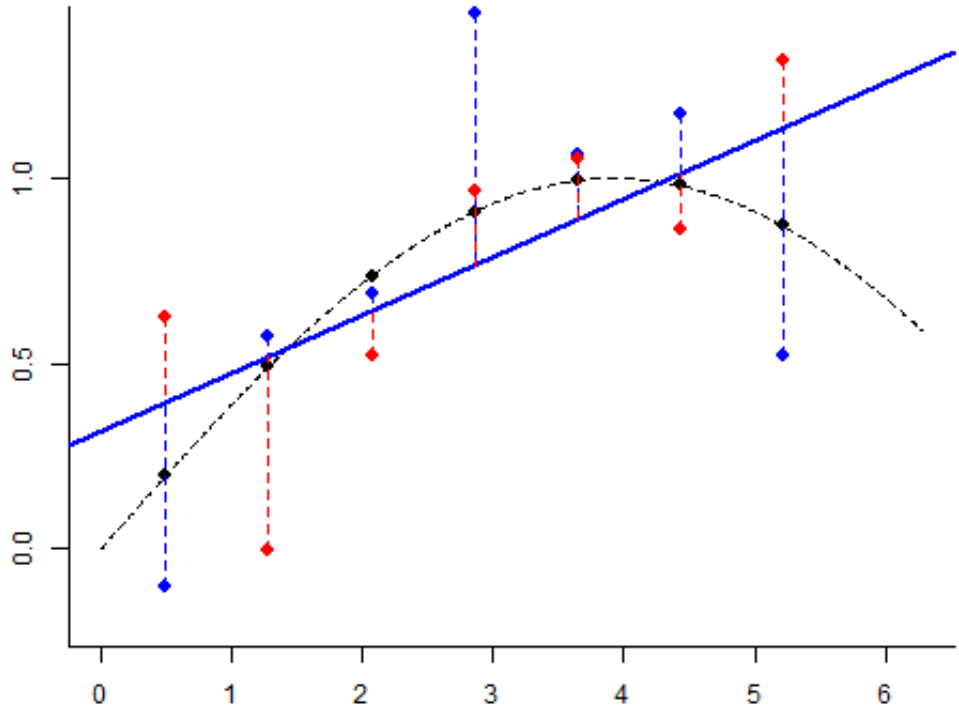
Error de predicción

Modelo ajustado (posiblemente falso)



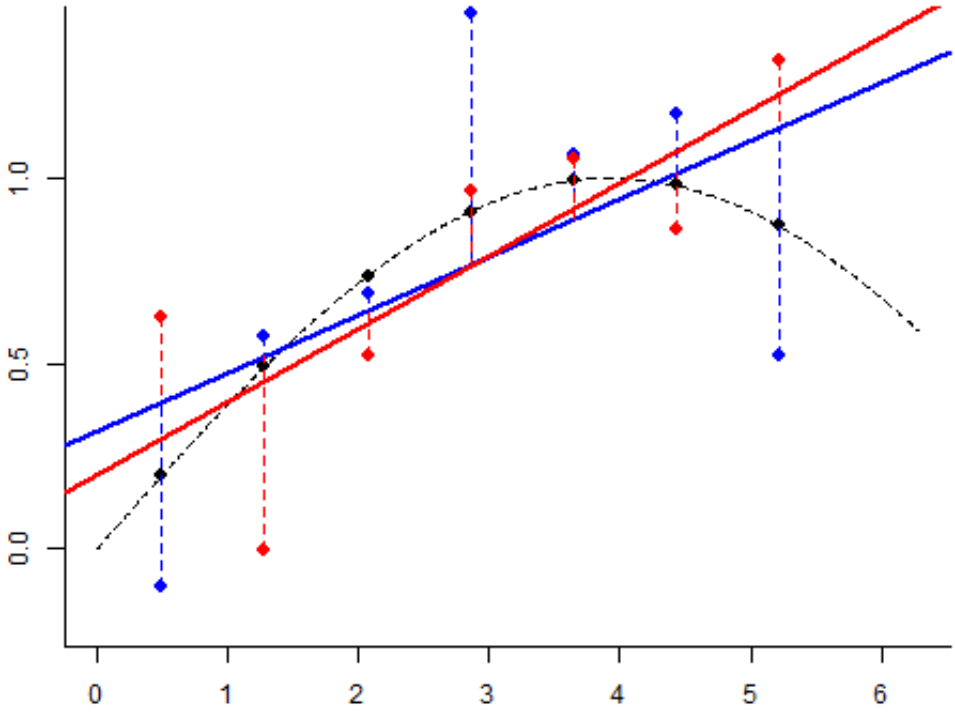
Error de predicción

Datos de test



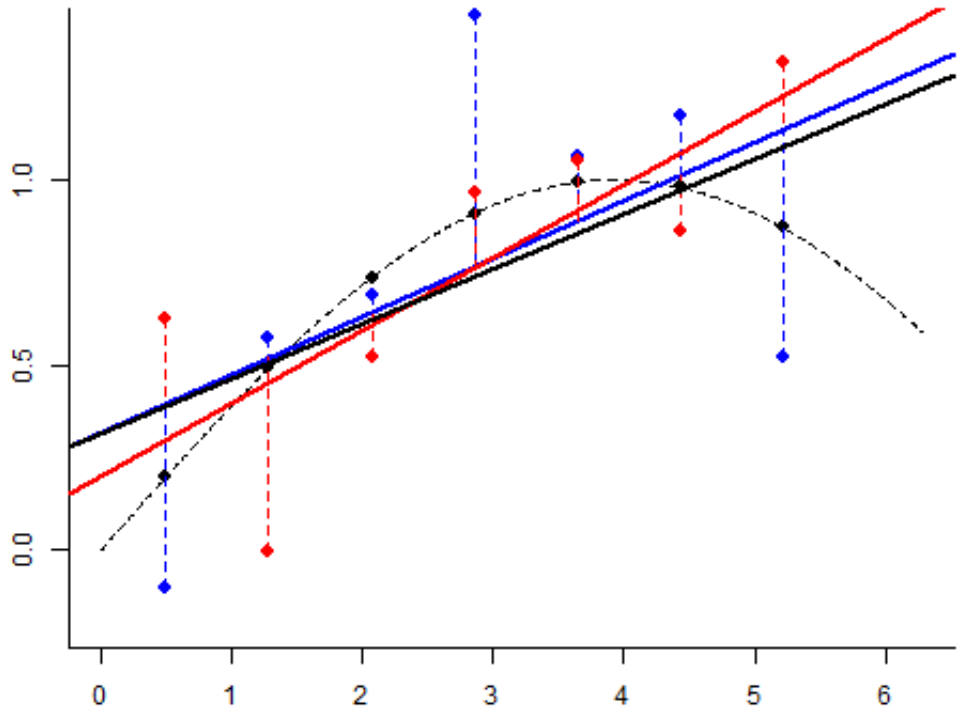
Error de predicción

Datos de test



Error de predicción

El mejor modelo que podríamos ajustar (inobservable)



Modelo verdadero

- Muestra de entrenamiento (puntos azules) $Y = (Y_1, \ldots, Y_n)'$
- Muestra de test (puntos rojos) $\tilde{Y} = (\tilde{Y}_1, \ldots, \tilde{Y}_n)'$

Hipótesis

- Vectores Y e $\tilde{Y}$ son i.i.d.
- Media: $\mathrm{E}(Y) = \mathrm{E}(\tilde{Y}) = \mu = (\mu_1, \ldots, \mu_n)'$ (puntos negros)
- Matriz de covarianzas: $\mathrm{Var}(Y) = \mathrm{Var}(\tilde{Y}) = \Sigma$

- No se supone que exista ningún tipo de relación entre X e Y
- La estructura de covarianzas de Y es totalmente general

Modelo ajustado

- Matriz de diseño fija $n \times p$, X
- $p < n$ y $\text{rango}(X) = p$
- Se ajusta el modelo de regresión lineal:

$$Y = X\beta + \varepsilon \Leftrightarrow Y = \mu + \varepsilon, \quad \mu \in V = \{X\beta : \beta \in \mathbb{R}^p\}$$

- Mínimos cuadrados: $\hat{\beta} = (X'X)^{-1}X'Y$ (recta azul).
- Notación: $\tilde{\beta} = (X'X)^{-1}X'\tilde{Y}$ (recta roja)
- Modelo lineal ideal: $\beta^* = (X'X)^{-1}X'\mu$ (recta negra)

$$\mathrm{E}(\hat{\beta}) = \mathrm{E}(\tilde{\beta}) = \beta^*$$

$$\mathrm{Var}(\hat{\beta}) = \mathrm{Var}(\tilde{\beta}) = (X'X)^{-1}X'\Sigma X(X'X)^{-1}$$

Errores de predicción esperados

$$\text{Training} = \text{E}\left[\sum_{i=1}^{n}(Y_i - x_i'\hat{\beta})^2\right] = \text{E}(\|Y - X\hat{\beta}\|^2)$$

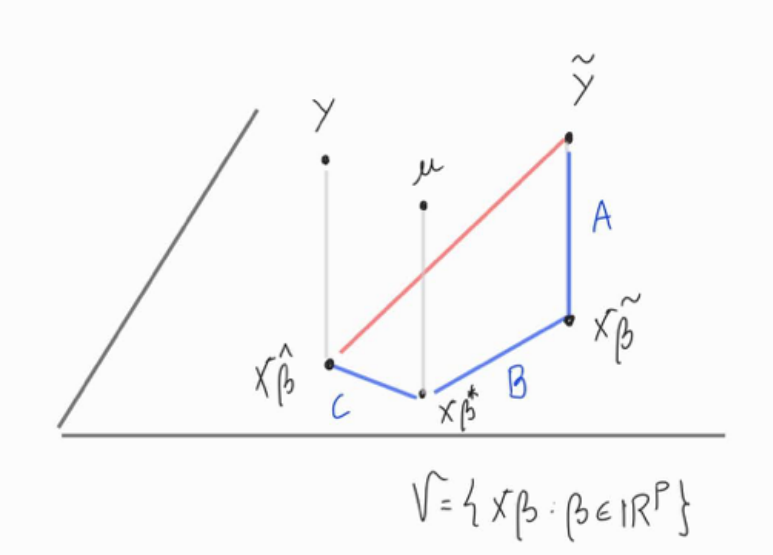
$$\text{Test} = \text{E}\left[\sum_{i=1}^{n}(\tilde{Y}_i - x_i'\hat{\beta})^2\right] = \text{E}(\|\tilde{Y} - X\hat{\beta}\|^2)$$

Objetivo

Estudiar el nivel de optimismo, la diferencia entre *Training* y *Test*:

$$\text{Test} = \text{Training} + \text{Optimismo}$$

Interpretación geométrica



$$\text{Test} = \text{Training} + 2\text{E}(\|C\|^2)$$

Optimismo

- Queremos calcular

$$\mathrm{E}(\|C\|^2) = \mathrm{E}[(\hat{\beta} - \beta^*)' X' X (\hat{\beta} - \beta^*)$$

- El valor esperado de una forma cuadrática: sea Z un vector aleatorio de media μ y matriz de covarianzas V, y sea A una matriz simétrica. Entonces,

$$\mathrm{E}(Z' A Z) = \mu' A \mu + \mathrm{traza}(VA)$$

- Aplicando este resultado:

$$\mathrm{E}[(\hat{\beta} - \beta^*)' X' X (\hat{\beta} - \beta^*)] = \mathrm{traza}(\Sigma H)$$

$$\mathrm{Test} = \mathrm{Training} + 2\,\mathrm{traza}(\Sigma H) = \mathrm{Training} + 2 \sum_{i=1}^{n}$$

Dos casos particulares

Variables independientes y homocedásticas

- Las hipótesis más habituales:

$$\Sigma = \sigma^2 \mathbb{I}_n \Rightarrow \text{traza}(\Sigma H) = \sigma^2 \text{traza}(H) = \sigma^2 p$$

$$\text{Test} = \text{Training} + 2p\sigma^2$$

Dos casos particulares

Variables independientes pero heterocedásticas

- $\Sigma = \text{diag}\{\sigma_1^2, \ldots, \sigma_n^2\}$

$$\Sigma = \text{diag}\{\sigma_1^2, \ldots, \sigma_n^2\} \Rightarrow \text{traza}(\Sigma H) = \sum_{i=1}^{n} \sigma_i^2 h_{ii},$$

donde h_{ii} es el *leverage* de la observación i, el correspondiente elemento de la diagonal de H

$$\text{Test} = \text{Training} + 2\sum_{i=1}^{n} \sigma_i^2 h_{ii}$$

Bootstrap en regresión

- Regresión simple, diseño fijo
- La varianza de la pendiente de la recta de mínimos cuadrados es

$$\mathrm{Var}(\hat{\beta}_1) = \sigma^2 / \sum_{i=1}^{n} (x_i - \bar{x})^2$$

- Supongamos que no conocemos o no sabemos deducir la fórmula anterior. El objetivo es aproximar $\mathrm{Var}(\hat{\beta}_1)$ mediante simulación.
- El método bootstrap también da una aproximación a la distribución de $\hat{\beta}_1$ en el caso en que no se cumple la hipótesis de normalidad

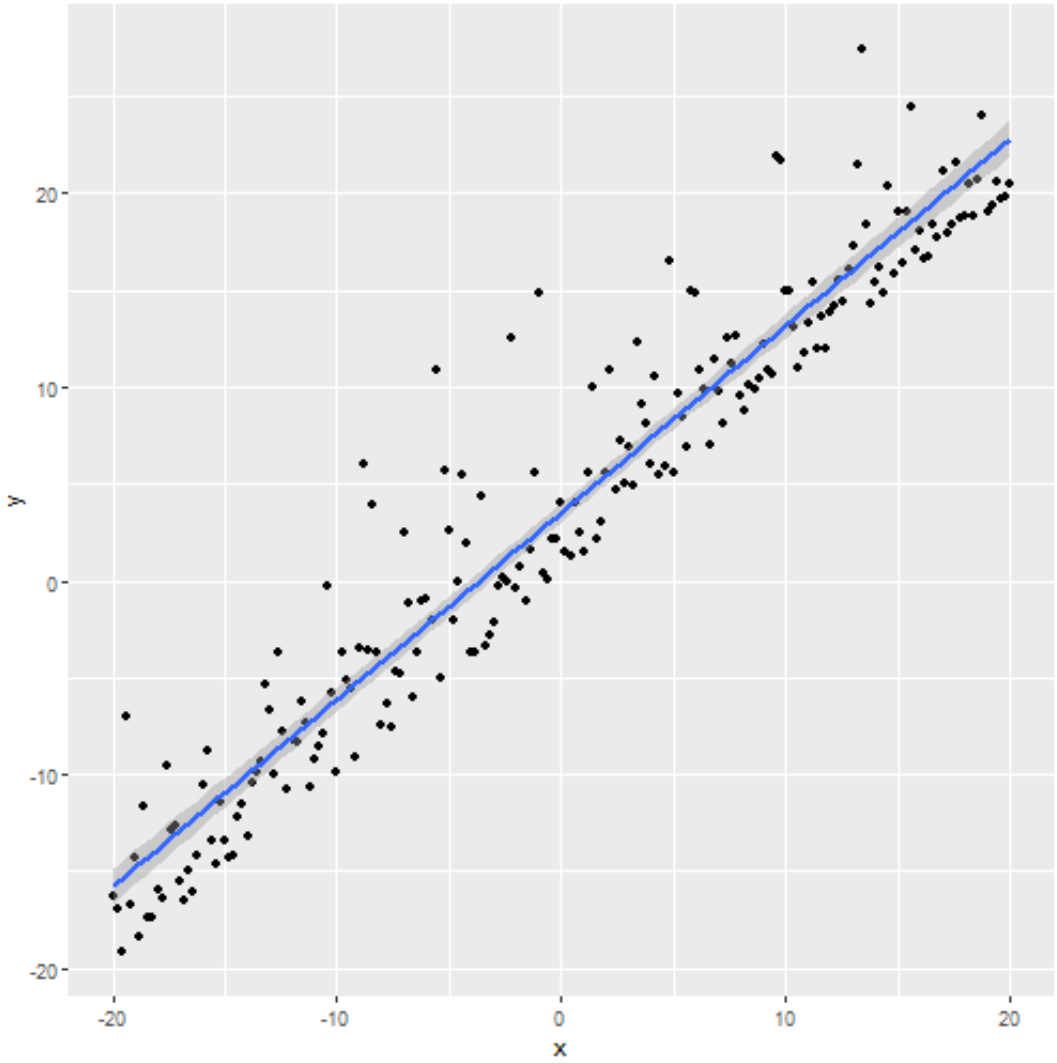
Ejemplo: generación de datos

```r
# Parámetros
beta0 <- 0
beta1 <- 1
sigma <- 4

# Muestra original de (x, y)
set.seed(100)
x <- seq(-20, 20, 0.2)
n <- length(x)

epsilon <- rexp(n, rate = 1/sigma)
y <- beta0 + beta1*x + epsilon
summary(lm(y~x))

# Desviación típica verdadera
dt_beta1 <- sigma / sqrt(sum((x-mean(x))^2))
dt_beta1

# Representación gráfica
ggplot(data.frame(x, y), aes(x, y)) +
  geom_point() +
  geom_smooth(method = lm)
```

Ejemplo: generación de datos

```
##
## Call:
## lm(formula = y ~ x)
##
## Residuals:
##    Min     1Q Median     3Q    Max
## -3.846 -2.329 -1.083  1.192 12.780
##
## Coefficients:
##             Estimate Std. Error t value Pr(>|t|)
## (Intercept)  3.53993    0.23729   14.92   <2e-16 ***
## x            0.96474    0.02045   47.18   <2e-16 ***
## ---
## Signif. codes:  0 '***' 0.001 '**' 0.01 '*' 0.05 '.' 0.1 ' ' 1
##
## Residual standard error: 3.364 on 199 degrees of freedom
## Multiple R-squared:  0.9179,    Adjusted R-squared:  0.9175
## F-statistic:  2226 on 1 and 199 DF,  p-value: < 2.2e-16

## [1] 0.02431263
```

Ejemplo: generación de datos



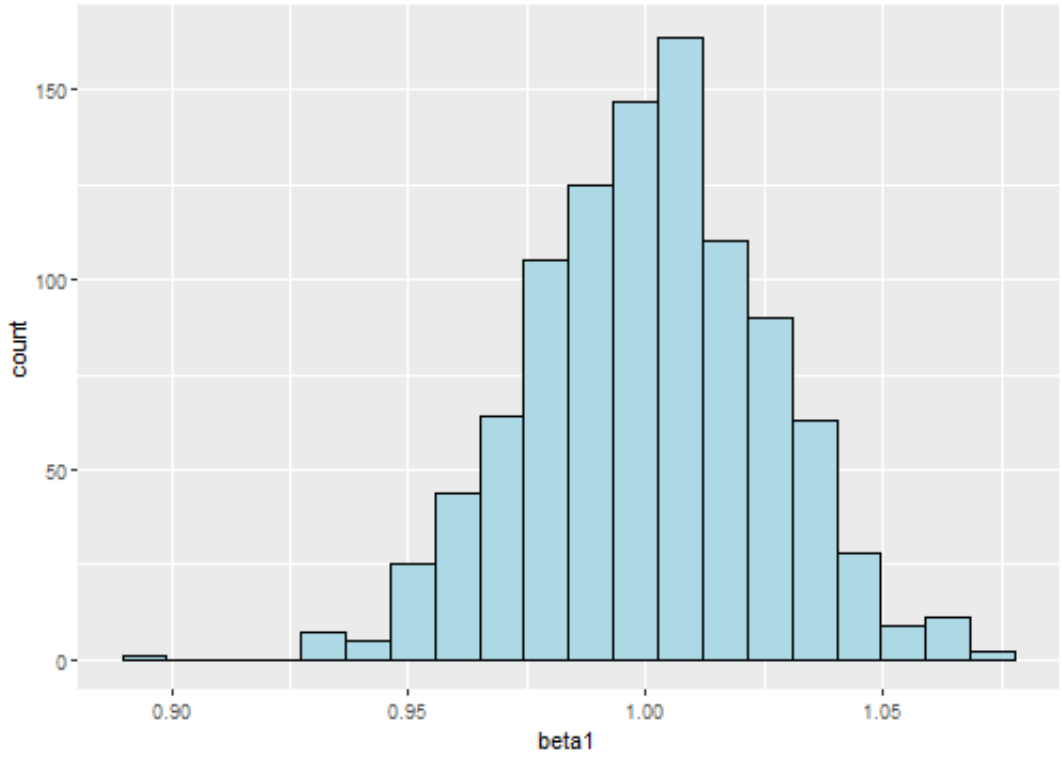
Ejemplo: simulación

```
# Aproximación por simulación
R <- 1000

beta1_sim <- NULL
for (i in 1:R){
  epsilon_sim <- rexp(n, rate = 1/sigma)
  y_sim <- beta0 + beta1*x + epsilon_sim
  beta1_sim[i] <- coefficients(lm(y_sim ~ x))[2]
}
sd(beta1_sim)
```

```
## [1] 0.02497163
```

Ejemplo: simulación

```
ggplot(data.frame(beta1 = beta1_sim)) +
  geom_histogram(aes(x = beta1), fill = 'lightblue', col
```



Ejemplo: bootstrap

- Como no conocemos los parámetros usamos los valores estimados con la muestra original
- Como no sabemos cuál es la distribución de los errores, generaramos los valores de Y usando la distribución empírica de los residuos

```
# Aproximación por bootstrap
R <- 1000

# Parámetros estimados
reg <- lm(y~x)
beta0_hat <- coefficients(reg)[1]
beta1_hat <- coefficients(reg)[2]
residuos <- residuals(reg)


beta1_boot <- NULL
for (i in 1:R){
  epsilon_boot <- sample(residuos, n, rep = TRUE)
  y_boot <- beta0_hat + beta1_hat*x + epsilon_boot
  beta1_boot[i] <- coefficients(lm(y_boot ~ x))[2]
}
sd(beta1_boot)
```

```
## [1] 0.01964217
```

Ejemplo: bootstrap

```
ggplot(data.frame(beta1 = beta1_boot)) +
  geom_histogram(aes(x = beta1), fill = 'lightblue', col
```